

# ÉRTEKEZÉSEK EMLÉKEZÉSEK

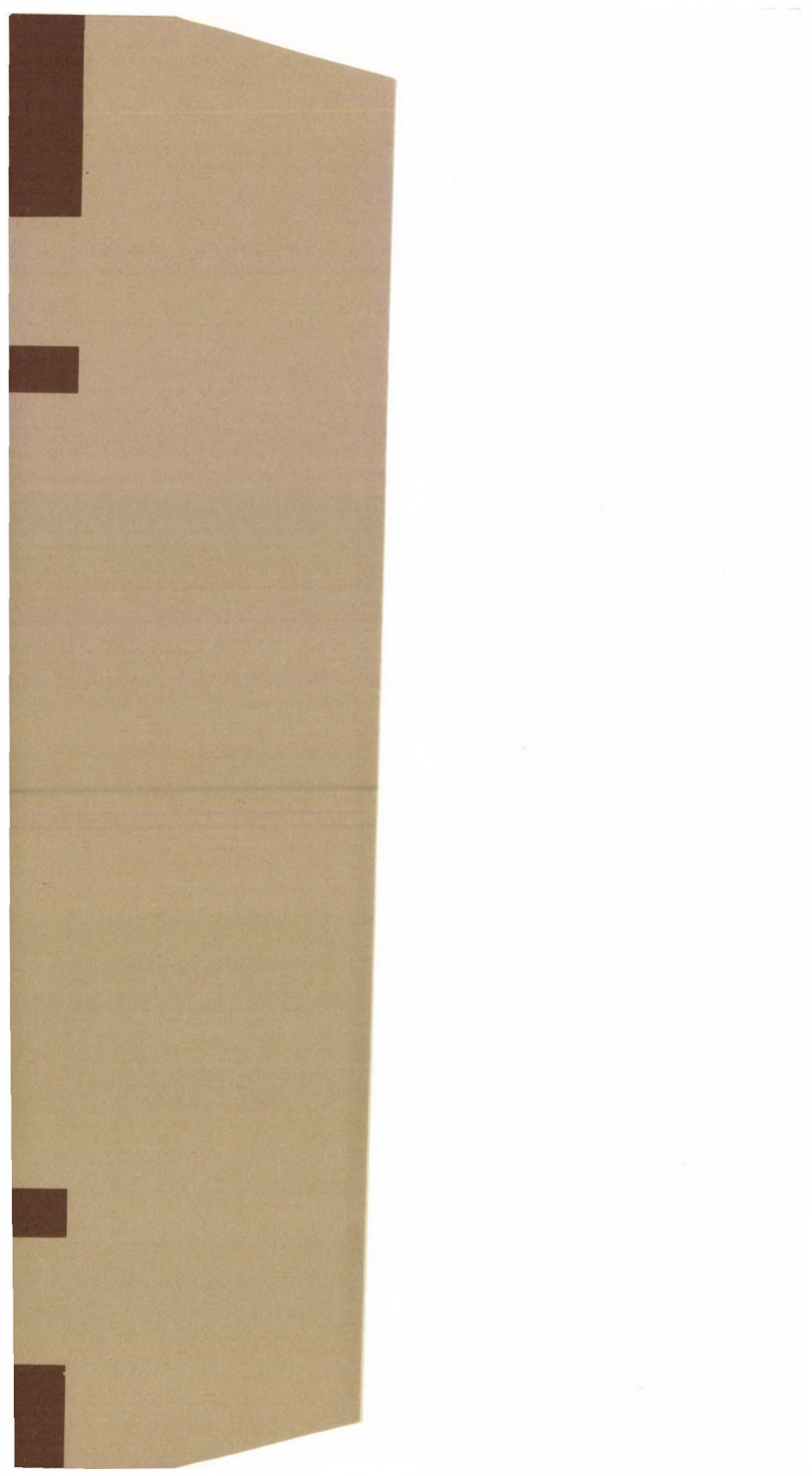
BENEDEK PÁL

A MODUL ELV



84

AKADÉMIAI KIADÓ, BUDAPEST



ÉRTEKEZÉSEK  
EMLÉKEZÉSEK

# ÉRTEKEZÉSEK EMLÉKEZÉSEK

SZERKESZTI  
TOLNAI MÁRTON

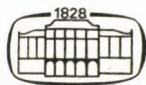


BENEDEK PÁL

A MODUL ELV

AKADÉMIAI SZÉKFOGLALÓ

1988. FEBRUÁR 16.



AKADÉMIAI KIADÓ, BUDAPEST

A kiadványsorozatban a Magyar Tudományos Akadémia 1982.  
évi CXLII. Közgyűlése időpontjától megválasztott rendes  
és levelező tagok székfoglalói — önálló kötetben — látnak  
napvilágot.

A sorozat indításáról az Akadémia főtitkárának 22/1/1982.  
számú állásfoglalása rendelkezett.

ISBN 963 05 5930 7

Kiadja az Akadémiai Kiadó, Budapest

© Benedek Pál, 1991

Minden jog fenntartva, beleértve a sokszorosítás, a nyilvános  
előadás, a rádió- és televízióadás, valamint a fordítás jogát, az  
egyres fejezeteket illetően is.

Printed in Hungary

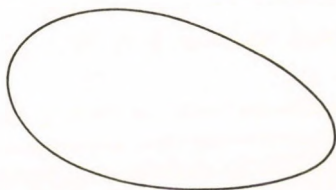
Mielőtt hozzákezdenék érdemi mondanivalóim taglalásához, szeretnék tanárainknak, tanítványainknak, régebbi és jelenlegi munkatársainknak — akikkel vegyészmérnöki pályám során együttműködni szerencsém volt — hálás köszönetet mondani. Kiváltképp szeretnék felsorolni négy nevet, azokét, akik már nincsenek közöttünk és akiknek pályám alakulásában és azoknak az eredményeknek kialakulásában, amelyről ma szót ejtek, a legtöbbet köszönhetek.

FREUND MIHÁLY  
LÁSZLÓ ANTAL  
PREISCH MIKLÓS  
VARGA JÓZSEF

Négy ennyire különböző embert egymás mellé sorolni nem is olyan egyszerű dolog, de mégis van valami, ami ezt a négy végletesen eltérő világnézetű, életvitelű, kutatási metodikájú vegyészt egy csoportba sorolja. Az tudniillik, hogy teljesen azonos véleményük volt a tudományról. Úgy vélték, hogy a tudományt a nemzet felemelkedése végett kell művelni, és hogy eredményeink a nemzeti határokkal nem szabdaltsanak tudomány közös kincse. Mert csipegetni ugyan lehet a terített asztalról, de falatoz-

ni csak akkor, ha még a terítés előtt vittünk is valamit a konyhára.

De hát mit is jelent az, hogy a tudományt művelni kell? A tudományt művelni annyit jelent, hogy meg akarjuk ismerni a világot. A világ megismerésére irányuló tevékenységünkben alapvető paradigma az ismeretelméletből,



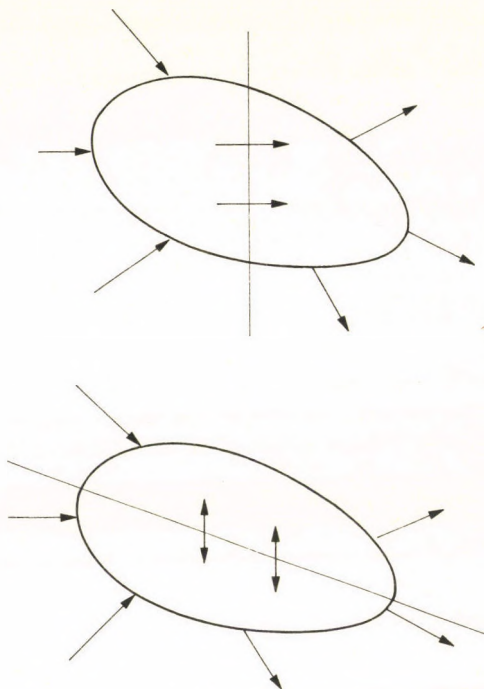
1. ábra

hogy a világ megismerhető. A probléma abból származik, hogy nem tudjuk, mi a világ és nem tudjuk, mit is jelent az, hogy megismerhető. Ezért aztán abban a szakmában, amelyikben mi dolgozunk, gyakorlati fogásokra van szükség. Nem törekedünk arra, hogy az egész világot ismerjük meg egyszeriben, szerényen megelégszünk azzal, hogy a világnak csupán egy kis részével foglalkozunk.

Az, hogy megismerjük ezt a kis részt, annyit tesz, hogy a működéséről alkotunk képet magunknak. Az 1. ábrán látható krumplic jelzi a világnak ezt a szóban forgó részét, és azért használom ezt a póri kifejezést, mert a fennköltebbek már ebben vagy abban a szűkebb szakmában foglaltak, és valami speciálisat je-



lentenek. Miután kijelöltük a világnak azt a kisebb részét, amely vizsgálódásunk tárgya lesz, addig munkálkodunk, amíg képesek vagyunk megmondani, hogy miképpen viselkedik, ha a külvilágból hatások érik. Hogyan változik ő maga és milyen hatásokkal reagál a külvilág felé. A baj megint akkor jelentkezik, amikor kiderül, hogy a krumpli túlságosan nagy, túlságosan nehéz kezelni, nem boldogulunk vele. Ekkor kerül elő ismét az a műfogás, amit egyszer már alkalmaztunk, az tudniillik, hogy megelégszünk a világ egy még kisebb részének a megismerésével. A krumplit evégre részekre vágjuk, mondjuk két részre, és amint a 2. ábra fölül mutatja, azt figyeljük, hogy a bal oldali félkrumpli hogyan viselkedik, ha hatás éri a külvilágból, mi történik benne és milyen hatásokkal válaszol a külvilág felé. A vízszintes nyilak jelentik ezeket, amelyek egy- szersmind a külvilágból érkező hatások a jobb oldali félkrumpli számára. Ez a maga részéről reagál ezekre a hatásokra a külvilág felé. A vízszintes nyilak a két félkrumpli között terjedő hatást jelentenek, vagyis tulajdonképpen a krumplin belül maradnak. Ezért tehát a végeredmény az, hogy sikerül azt is leírni, milyen hatásokat bocsát ki a krumpli a külvilág felé, ha őt magát hatások érik a külvilágból. Elnevezem a félkrumplit modulnak, és akkor azt is mondhatjuk, hogy a modulok szekvenciálisan helyezkedtek el ebben az összeállításban. Ám a krumplit másképpen is fel lehet vágni, nevezé-



2. ábra

tesen hosszában, ami tulajdonképpen annyit tesz, hogy vizsgáljuk, miképpen viselkedik egy szalmakrumpli bizonyos hatásra, aztán miképpen reagál ugyanakkor egy másik szalmakrumpli egy más jellegű hatásra, és így tovább. Itt tehát párhuzamos modulokról van szó, és ezek együttesen akkor képesek a valóság kiválasztott részének viselkedését leírni, ha megfelelő módon össze is vannak kapcsolva egymás-

sal, miként a szekvenciális modulok is össze vannak kapcsolva, mert különben szétesik a világ. A modul fogalom itt a valóságot is jelenti, meg annak égi mását is, ez utóbbi a mi praxisunkban a matematikai modell.

Tehát ebben az értelemben beszélek modulokról és arról, hogy a modulok egyszerű esetben szekvenciálisan vagy párhuzamosan kapcsolódnak egymáshoz. A következő 3. ábrán mindjárt szeretnék egy példát bemutatni a párhuzamosan kapcsolt modulok használatára az utóbbi évek kutatásaiból [1, 2, 3].

$$P = \frac{RT}{(v-b)} - A^* \frac{(RT_c)^2}{P_c}$$

$$A = \frac{\text{hőmérséklet modul}}{\text{térfogat modul}}$$

$$A = \frac{\alpha_c * \alpha[T; m]}{f[v]}$$

3. ábra

Valamilyen kémiai anyag, fluidum hőmérséklete, nyomása és móltérfogata között egyedileg meghatározott összefüggés van, és ezt le lehet írni, vagy legalábbis jól lehet közelíteni egy harmadfokú egyenlettel. A 3. ábra felső sorában látható egy ilyen harmadfokú egyenlet, a szokásostól kissé eltérő alakban. A jobb oldal második tagjában ugyanis a konstansokat egyetlen törtbe csoportosítottam, másfelől



szerepel itt az  $A$  szorzófaktor, amelyet két modul hányadosával lehet kifejezni. A számlálóban a hőmérséklet modult két tényező szorzataként írhatjuk, és ebben  $\alpha_c$  a hőmérséklettől

| $f[v]$   |
|--|
| $v^2$<br>$v^*(v+b)$<br>$v^*(v+c)$<br>$v^*(v+\gamma b)$ |
| <hr/> $v(v+b)+b(v-b)$<br>$v(v+b)+v^*(v-c)$             |

↓

$\alpha_c$

4. ábra

független konstans, a második tényező pedig csakis a hőmérséklettől függ. Az  $A$  szorzófaktor nevezőjében a térfogati függvény jut szerephez, és az  $\alpha_c$  kapcsolja össze a két modult. A térfogati modulok készletét a 4. ábrán mutatom be, míg az 5. ábra a hőmérsékleti modulok gyűjteménye.

Ezek után joggal lehet feltenni azt a kérdést, hogy miképpen is kell egy köbös állapotegyenletet generálni? Úgy, hogy a térfogati modulok készletéből kivesszünk egy modult, aztán a hőmérsékleti modulok készletéből is kivesszünk egyet, összekapcsoljuk őket, és máris van egy

köbös állapotegyenletünk. A szakirodalomban nem ilyen egyszerűen írják le a dolgot. Ott minden szerző a maga állapotegyenletét dicséri, és azt mutatja meg, hogy az előző szerzőknél jobb állapotegyenletet tudott csinálni, ami

|   |
|---|
| $a[T;m]$  |
| $10^{m(1-T_r)}$ $\frac{1}{T_r^{0.5}}$ $\frac{1}{T_r}$ $\frac{(1+m(1-T_r^{0.5}))^2}{(1+m(1-T_r^{0.5\beta}))^2}$ $\left(1+(1-T_r)\left(m+\frac{n}{T_r}\right)\right)$ $\left(1+m\left(\frac{1}{T_r}-1\right)T_r\right)$ |

**5. ábra**

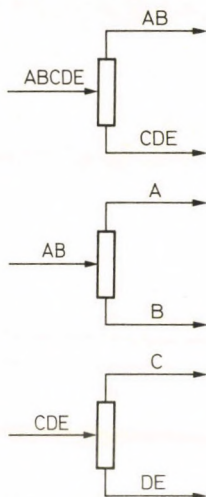
annyit jelent, hogy talál olyan  $\alpha_c$  és  $b$  paraméterpárt, amellyel egyenlete jól illeszkedik a felhasznált kísérleti  $P$ - $v$ - $T$  adatokra. Mi JANKÓ TAMÁSSAL azt tanácsoltuk, hogy egy állapotegyenlet helyett egy állapotegyenlet családot használjunk, azt amit HORVÁTH—LIN szerzők ajánlottak [4], és ezt finomítsuk az általuk használt hőmérsékleti modul helyett a Soave-félével [5]. Ha azonban ezt a módosított Horváth—Lin-állapotegyenletet poláris anyagra

alkalmazzuk, még egy második módosításra is szükség van a hőmérsékleti modulban. Ez aztán négyparaméteres köbös állapotegyenlethez vezet.

Ennyit első példaként a párhuzamos modulok használatáról, hogy most mindjárt a szekvenciális modulokra is mondhassak példát. Ha egy multikomponens elegyet — és ebben a példában ez az elegy ötkomponensű lesz — széjjel akarunk választani tiszta komponenseire, akkor erre használhatunk olyan lepárló oszlopokat, kolonnákat, amelyek a beléjük táplált elegyet két frakcióra választják. Ha valamely frakció még mindig többkomponensű, ez azt jelenti, hogy akkor újabb kolonnába kell bevezetni és abban újfent két részre választani. Akárhogy is mesterkedünk, mindig egy oszloppal kevesebb kell a feladat megoldásához, mint amennyi a komponensek száma, vagyis a mi példánkban a lepárlóoszlopok száma négy. Egy-egy lepárlóoszlop egy-egy modul, és ezeket a modulokat az különbözteti meg egymástól, hogy mi a betáplálás és mi a kilépő két frakció. Ezért tehát a kolonnákat szekvenciálisan kell összekapcsolni, figyelembe véve azt a szabályt, hogy kolonna input csakis egy előző kolonna valamelyik outputja lehet.

A mi esetünkben jelöljük az ötkomponensű inputot A-B-C-D-E szimbólummal. Ezt az elegyet vezetjük be az első kolonnába (mert ugye a modul ebben a speciális esetben a kolonna nevet viseli), és abból a 6. ábra felső sora sze-

rint kilép egy kétkomponensű elegy, A-B, a kolonna alján pedig egy háromkomponensű elegy, C-D-E. Mit kell csinálni? Sorba kell kapcsolni a következő kolonnát, amely az A-B



6. ábra

elegyet szeparálja két részre, két tiszta komponensre. Ezt mutatja a középső sor az ábrán. Az első kolonna alján megjelenő háromkomponensű elegyet az ábra harmadik sora szerint bevezetjük a harmadik kolonnába, ennek alján megjelenik a D-E, fejterméke viszont a tiszta C, amit a negyedik kolonnával választunk szét tiszta komponensekre. Ez egyike a 14 lehetséges megoldásnak. Ezek mindegyike a modulokat szekvenciális elrendezésben tartalmazza.



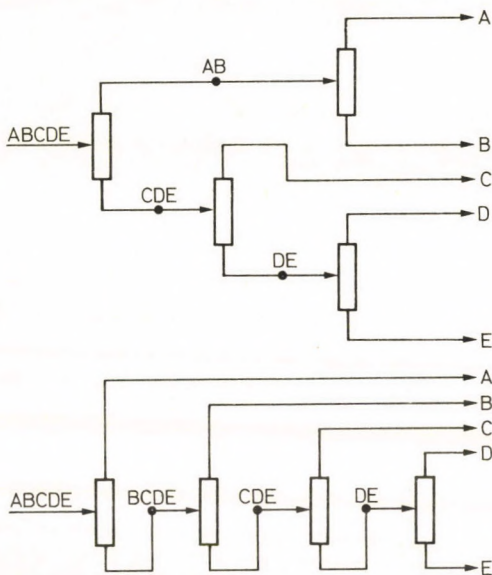
A 7. ábrán mindenesetre szeretném megmutatni, hogy ötkomponensű elegy feldolgozása során milyen modulok jelenlétére lehet számítani. Van egyetlen ötkomponensű elegy, amelyet négyféleképpen lehet két részre választani,

| Komponensek száma |       |      |     |
|-------------------|-------|------|-----|
| 5                 | 4     | 3    | 2   |
| A BCDE            | A BCD | A BC | A B |
| AB CDE            | AB CD | AB C | B C |
| ABC DE            | ABC D | B CD | C D |
| ABCD E            | B CDE | BC D | D E |
|                   | BC DE | C DE |     |
|                   | BCD E | CD E |     |
| 4                 | 6     | 6    | 4   |

7. ábra

ez négy modult jelent az első oszlopban. Két négykomponensű elegyet hatféleképpen lehet két részre választani, ez összesen hat modult jelent. Ezek szerepelnek az ábra második oszlopában. A következő oszlopban is hat modul van, azért ennyi, mert három háromkomponensű elegy létezik, és ezek mindegyikét kétféleképpen lehet szétválasztani. Végül négy olyan modul szerepel, amelyek kétkomponensű elegyek szétválasztására szolgálnak. Vagyis ebben a feladatban mindösszesen húsz különböző modul szerepel, és létezik ezeknek tizennégy különböző szekvenciája.

Ezekből most szeretnék megmutatni kettőt a 8. ábrán, éspedig először azt, amelyet egyes részleteiben már mutattam, de van itt egy másik megoldás, egy más szekvencia is, az alsó sorban. A tizennégy szekvencia nem olyan



8. ábra

borzasztóan sok, de egy mondjuk tízkomponensű elegy esetében a szekvenciák száma már ötezer körül van, s ezzel a kombinatorikus robbanás tartományába kerülünk, és valahogyan el kell kerülni ezt a robbanást, hiszen a tízkomponensű elegy még a reális technológiai esetek közé tartozik. Ennek akkor van lehető-

sége, ha a lehetséges modulok közül egy vagy több, eddig figyelembe nem vett szempontot is szinte szűrőként figyelembe veszünk. Ezek javarészt gazdasági szempontok, és heurisztikus szabályokban fogalmazzuk meg őket.

A heurisztikus szabály azt jelenti, hogy vagy elméleti megfontolásból, vagy tapasztalatból tudjuk, vagy már öregapáink is mondták, hogy valamit jó így, s nem jó úgy csinálni.

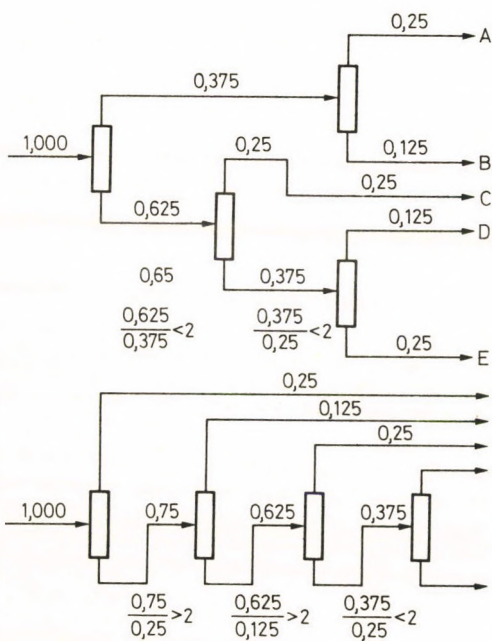
Most előveszek egyetlen heurisztikus szabályt, hogy megmutassam, miként lehet az ilyen heurisztikus szabályokat használni. A szabály így szól, részesítsd előnyben azokat a modulokat, amelyek nagyjából azonos áramokra osztják szét a betáplálást, vagyis ha az áramok aránya nem nagyobb mint kettő, és nem kisebb mint fél. Vegyük azt az esetet, amikor az A, C és E komponens móltörtje 0,25, a B és D móltörtje pedig 0,125. A 7. ábra moduljai közül a heurisztikus szabálynak meg nem felelőket töröltem, és így jutottam a 9. ábrához. Jól látható, hogy ebben nem szerepelnek már négykomponensű modulok, és a háromkomponensű modulok közül is csak kettő maradt.

A 10. ábrán megmutatom, hogy az a szekvencia, amelyet kezdetben tárgyaltam, összeállítható a megmaradt modulokból, az alsó sorban feltüntetett szekvencia azonban tiltott modulokat tartalmaz. (Az előző szekvenciákhoz még visszatérek.) Ilyen és ehhez hasonló szűrőkkel lehet a kombinatorikus robbanást



| Komponensek száma |   |                                  |                          |
|-------------------|---|----------------------------------|--------------------------|
| 5                 | 4 | 3                                | 2                        |
| AB CDE<br>ABC DE  |   | A BC<br>AB C<br><br>C DE<br>CD E | A B<br>B C<br>C D<br>D E |

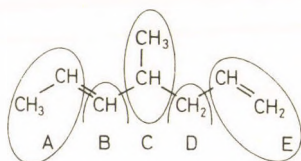
9. ábra



10. ábra

elkerülni. Az optimális vagy közel optimális sorrend tervezése azonban olyan messzebbre vezető téma, amelyet részletesen JÓZSA LÁSZLÓval és VARGA ERNŐvel dolgoztunk ki [6, 7].

|   |   |
|---|---|
| A | $\text{CH}_3-\text{CH} \langle$   |
| B | $\rangle \text{CH}-$  |
| C | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH} \\ \diagup \end{array}$ |
| D | $-\text{CH}_2-$   |
| E | $-\text{CH}=\text{CH}_2$  |

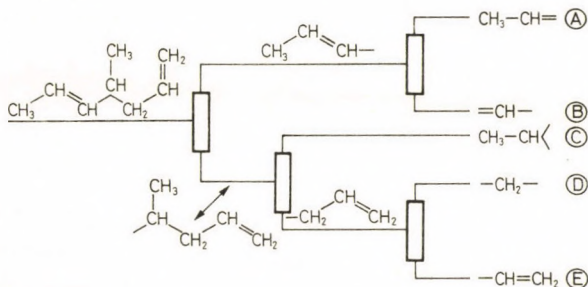


11. ábra

Ha az előző témánkban szereplő A, B, C, D, E szimbólumok helyébe azokat a szerves kémiai fragmentumokat írjuk, amelyeket a 11. ábrán adtam meg, akkor az A-B-C-D-E elegynek az ábra alján megadott szerves vegyület fog megfelelni. Ez egy nyolcszénatomos szénhidrogén, két kettős kötéssel. A 12. ábrán ismét megjelenik az a szekvencia, amelyre a 10. ábrán hívtam fel a figyelmet, azzal a különbséggel persze, hogy most a betűk helyére a

megfelelő fragmentumokat írtam, és nincsenek rajta nyilak.

A szekvenciát balról jobbra is lehet olvasni, de lehet jobbról balra is. Mit is jelent tehát ez a séma? Ha jobbról balra olvassuk, akkor azt jelenti, hogy milyen fragmentumokból lehet a

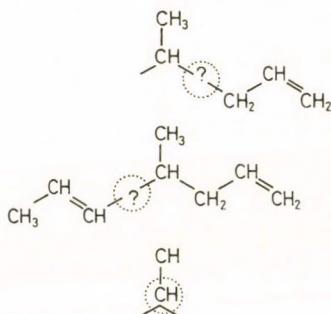


12. ábra

célvegyületet felépíteni, ha balról jobbra, akkor azt mutatja meg, hogy milyen fragmentumokra lehet — gondolatban — a nyolcszénatomos vegyületet felbontani. Kombinatorikusan ezúttal is 14 szekvenciával számolhatunk antitetikus irányban, szintetikus irányban azonban a helyzet kissé más képet ölt. Ugyanis az a modul, ami az előző példában lepárlóoszlopot jelentett, most a jobbról balra olvasásban, vagyis a szintézis irányában szerves kémiai reakciót jelent.

Így például a D-E- fragmentum összekötése a háromszénatomos -C- fragmentummal egy ötszénatomos fragmentumhoz vezet a 13. ábra

felső sorában, és most már csupán az van hátra, hogy ezt összekössük az ugyancsak háromszénatomos A-B- fragmentummal. De azt kell meggondolni, hogy fragmentumok nem léteznek, és helyettük valóságos szerves vegyületekkel kell a szintézist megvalósítani. Az ábrán a

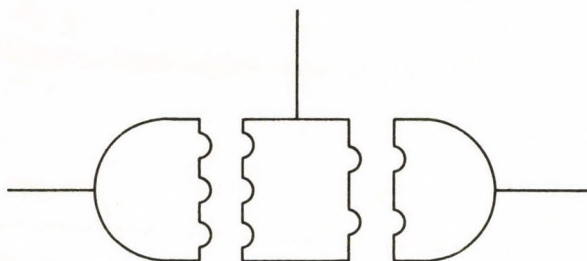


13. ábra

szaggatott vonallal megjelölt helyeken jelentkezik ez a probléma, és az ott látható kérdőjelek éppen azt kérdezik, milyen funkciós csoport teszi a fragmentumot valós vegyületté, és milyen szerves kémiai reakcióval lehet ezeket úgy reakcióra bírni, hogy a kérdőjel helyén kovalens kötés alakuljon ki. Erre a kérdésre nem egy válasz van. Egy kérdőjel helyén álló modul maga is egy modulkészletből választható, és ezért mondtuk, hogy a lehetséges kombinációk száma meghaladja a 14-et. Mindazonáltal az ábra alsó sorában arra hívom fel a figyelmet, hogy a  $\text{CH}_3 - \text{CH} \begin{smallmatrix} \diagup \\ \diagdown \end{smallmatrix}$  fragmentum



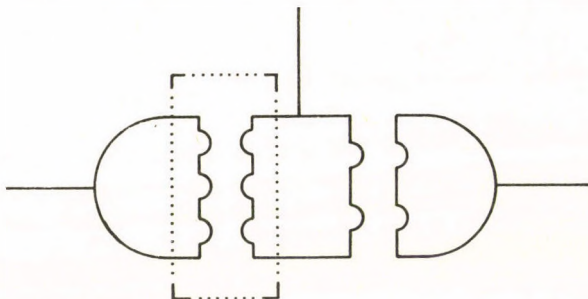
karbonatomja kulcshelyzetben van. Ugyanis először a felső sor szerint kell reagálnia, aztán pedig a középső sor szerint. Ez nagyon lényeges szempont, és ennek számbavétele a szintézisszekvenciák tervezése során fellépő kombinatorikus robbanás kivédésére szolgál. Mert miről is van szó?



14. ábra

A 14. ábrán három formadarabot látni. A jobb oldali jelezze azt a vegyületet, amely a -D-E fragmentum helyébe lép, a középső a -C-fragmentum helyébe lépő és a bal oldali az A-B- helyébe lépő vegyület. A profilok összeillenek, a szintézis keresztülvihető. A 15. ábrán a jobb oldali profilok összeillenek, a bal oldaliak azonban nem, ez a szekvencia tehát nem megfelelő. Az igény tehát az, hogy a fragmentumok szekvenciája és a modulok szekvenciája közötti különbséget vegyük figyelembe. Ezt a szempontot hívják a szerves kémiában átfedésnek. Az átfedés megment a kombinatorikai robbanástól, de azért ugyanannak a vegyület-

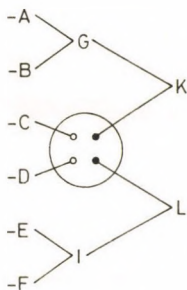
nek az előállításához több szekvencia is elvezet. A konvergens szintézisek algoritmikus tervezése szerteágazó témakör, amelynek egyes részleteit ERDŐS IVÁNNAL és BOROSSY ANDRÁSSAL dolgoztuk ki [8, 9].



15. ábra

A szintézistervezés másképpen jelentkezik akkor, ha nem egy vegyületet akarunk előállítani, hanem többet. Több tucatot, esetleg több százat. Példaképpen vegyünk egyelőre azt az esetet, amikor két vegyület előállításáról van szó, nemcsak a K vegyületet akarjuk előállítani, hanem az L vegyületet is, és a 16. ábrán megmutatom azokat az utakat is, amelyeken a két szintézist vezetni akarjuk. Vagyis itt két szekvenciáról van szó, ám ezek párhuzamosan helyezkednek el, és az a sajátságuk, hogy összeköti őket a H anyag, mert mindkét szekvenciában részt vesz. Ennek az anyagnak tehát az a szerepe van, mint annak az  $\alpha_c$ -nek, amikor

párhuzamos modulok összekapcsolásáról beszélttem állapotegyenletekkel kapcsolatban, de ezúttal már nem párhuzamos modulok, hanem párhuzamos szekvenciák összekapcsolásáról van szó. Ilyen esetben szerkezetről fogok beszélni.



16. ábra

Ebben a szerkezetben a H anyag van kulcs-helyzetben, és az ilyen anyagokat intermedie-reknek nevezzük. Ezeknek az a sajátossága van, hogy nincsenek egyetlen célvegyülethez rendelve. Ha már most ezt a két célvegyületre felírt feladatot általánosítjuk, vagyis a célvegyületek egy nagyobb halmazára alkalmazzuk, mondjuk olyanra, mint amelyet a magyar vegyipar jelent, akkor az előforduló anyagok száma ezer fölé nő. Ekkor az anyagokat legjobb számmal azonosítani, nem hosszadalmas kémiai elnevezéssel.

Azt szeretném megmutatni a 17. ábrán, hogy miként fest egy ilyen nagy adatbázisból egyetlen intermedierre vonatkozó rész. Itt a



|     |     |        |     |      |       |
|-----|-----|--------|-----|------|-------|
| 201 | 101 | 0,550  | 201 | 204  | 0,66  |
|     |     |        | 201 | 210  | 0,716 |
|     |     |        | 201 | 506  | 0,75  |
|     |     |        | 201 | 803  | 0,7   |
|     |     |        | 201 | 1118 | 0,001 |
|     |     |        | 201 | 522  | 0,42  |
| 202 | 134 | 26,000 | 202 | 1101 | 0,49  |
| 203 | 23  | 0,779  | 203 | 420  | 0,71  |
|     | 149 | 1,3499 | 203 | 301  | 0,719 |
|     |     |        | 203 | 418  | 1,3   |
|     |     |        | 203 | 304  | 1,42  |
|     |     |        | 203 | 305  | 0,8   |
|     |     |        | 203 | 312  | 1,325 |
|     |     |        | 203 | 352  | 0,4   |
|     |     |        | 203 | 357  | 0,376 |
|     |     |        | 203 | 372  | 0,862 |
|     |     |        | 203 | 555  | 0,66  |
|     |     |        | 203 | 1310 | 0,281 |
|     |     |        | 203 | 1330 | 0,284 |
|     |     |        | 203 | 307  | 1,316 |
| 204 | 107 | 1,4598 | 204 | 1122 | 1,42  |
|     | 201 | 0,6595 | 204 | 417  | 0,7   |
|     | 4   | 0,127  |     |      |       |
|     | 39  | 0,171  |     |      |       |
|     | 91  | 0,038  |     |      |       |
|     | 94  | 0,038  |     |      |       |
| 205 | 108 | 1,0002 | 205 | 805  | 1,25  |
|     | 159 | 1,1992 | 205 | 808  | 0,72  |
|     |     |        | 205 | 1142 | 1,71  |
| 206 | 2   | 1,1999 | 206 | 1134 | 0,725 |
|     | 110 | 1,4198 |     |      |       |
| 207 | 32  | 1,2900 | 207 | 313  | 1,58  |
|     | 62  | 0,5599 |     |      |       |
| 208 | 102 | 0,3502 |     |      |       |
| 209 | 75  | 3,0000 | 209 | 309  | 1,13  |
| 210 | 164 | 2,1596 | 210 | 329  | 0,93  |
|     | 201 | 0,7157 |     |      |       |
| 211 | 72  | 1,2000 | 211 | 306  | 0,8   |
|     |     |        | 211 | 621  | 0,22  |
| 212 | 14  | 4,3200 | 212 | 1120 | 5,000 |
| 213 | 124 | 2,2199 | 213 | 336  | 0,786 |
| 214 | 126 | 0,6182 | 214 | 1035 | 0,9   |
|     | 56  | 0,745  |     |      |       |
| 215 | 19  | 1,1171 | 215 | 1033 | 0,809 |
|     | 126 | 0,6101 |     |      |       |
|     | 41  | 0,244  |     |      |       |

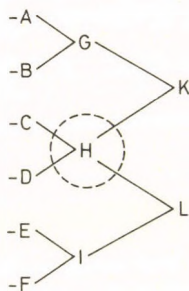
17. ábra

203 személyi számú anyagról van szó. Ennek előállítására a 23 és a 149 számú anyagot használjuk fel, mégpedig a harmadik oszlopban megadott fajlagos ráfordítással. Ez tehát a 203 számú intermedier előállítási modulja, amely sztöchiometriai információkat tartalmaz. A jobb oldali három oszlop a disztribúciós modul, amely megadja, hogy milyen anyagok előállításában, milyen fajlagosokkal vesz részt a 203 számú intermedier [10].

Előfordulhat egy ilyen nagy struktúrában, hogy valamilyen anyagot, mondjuk éppen a H anyagot, nem gyártanak. Ennek számos oka is lehet, mondjuk például az, hogy a szükséglet nem éri el a rentábilis gyártás alsó határát sem. Akkor a struktúra létezéséhez az kell, hogy a C és a D anyagot exportáljuk, a H intermediert pedig importáljuk. A kör a 18. ábrán ilyenformán a külkereskedelmet reprezentálja. Megjegyzem, lehet hasonló helyzetben Csehszlovákia és Lengyelország vegyipara is éppen a H intermedierrel kapcsolatban. Az ember gondolhat arra is vegyész fejjel, hogy ezek az országok segíthetnének egymásnak. Például úgy, hogy az egyik országban mindannyiok számára előállítják a H intermediert, immár a rentábilis gyártás alsó korlátja fölötti kapacitással. Ez kölcsönös gazdasági segítség lenne, aminek a megszervezésére multinacionális tanácsra lenne szükség.

Szóba kerülhet egy másik megoldás is, amely épphogy ellentettje a multinacionális-

nak. Arra is gondolhatunk ugyanis vegyész fejjel, hogy H intermediert nemcsak a 16. ábrán bemutatott úton lehet előállítani, vagyis D-ből és E-ből, hanem más anyagokból, más szekvencia szerint. Ha van más út is, vagy esetleg néhány más út is, akkor esetleg lehet



18. ábra

ezek között a szokásosnál, a konvencionálisnál, a nyugati cégek által ajánlottnál eltérő olyant találni, amely a mi hazai körülményeinknek, a mi szakmai képességeinknek, a mi történelmi hagyományainknak jobban megfelel. Ezzel kapcsolatban szeretném megemlíteni, hogy a mostanában közgazdászaink által vitatott olefin program egy részletére egy ilyen speciális, Magyarországon hazai erővel megvalósítható utat annak idején PREISICH MIKLÓSSal közösen dolgoztunk ki [11], és ebből annyi valósult meg, amennyit egy külföldi könyvrészletben megírtunk.

Nem akarom ezzel azt állítani, hogy minden ötlet jó, kiváltképpen a mi ötletünk ilyen, és azonnal át kell vinni a reálszférába. Az ötletekről döntení kell, és a munkamegosztás rendszerében mások szülik az ötleteket és megint mások döntenek a megvalósításról. Így alakul ki aztán valamilyen struktúra a vegyiparban. Nem is erről akarok beszélni, hanem arról, hogy milyen struktúra alakul ki akkor, amikor nem gazdasági, hanem természeti törvények döntenek arról, hogy milyen struktúra alakuljon ki, persze nem az iparban, hanem a természetben.

Példaként egy kémiai átalakulást szeretnék tárgyalni, amelyet elég részletesen vizsgáltunk szimulációs módszerekkel LÁSZLÓ ANTALLal, NÉMET ANDRÁSSal és VÁCZI PÁLLal az utóbbi 15 esztendőben [12—20].

Ennek a kémiai reakciónak két kiinduló anyaga van: a metán és az oxigén, és a reakció, amiről szó lesz, a metán égése. A két kiinduló anyag azonban közvetlenül nem reagál egymással, a metán úgy ég el az oxigénben, hogy közben mindenféle intermedierek keletkeznek és reagálnak. Ezeket a reakciókinetikában gyököknek nevezik és a modulokat elemi reakcióknak. Szorgalmas kutatók kivizsgálták azokat az elemi reakciókat, melyek C, H és O tartalmú elegyben előfordulnak bizonyos hőmérséklet-intervallumban. Ezeket összegyűjtötték és szép táblázatokban prezentálták a tudomány számára. A 19. ábrán egy ilyen mo-



| Reakció  | $A/(\text{cm}^3/\text{mol})^{n-1} \text{s}^{-1}$ | $b$  | $E/\text{kJ}$ |
|--|--|------|---------------|
| $\text{CH}_3 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$                              | $7,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$                                    | $6,6 \times 10^2$                                | 3,0  | 32,4          |
| $\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{O}$                 | $1,5 \times 10^{13}$                             | 0    | 120           |
| $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$ ( $k_c$ )                           | $2,4 \times 10^{14}$                             | -0,4 | 0             |
| $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}$                          | $8,0 \times 10^{14}$                             | 0    | 111           |
| $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$                        | $1,0 \times 10^{16}$                             | 0    | 134           |
| $\text{CH}_3 + \text{M} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H} + \text{M}$ ( $k_i$ )                 | $1,0 \times 10^{16}$                             | 0    | 379           |
| Reakciók $\text{CH}_2\text{O}$ -ból  |  |      |               |
| $\text{CH}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2$                             | $2,5 \times 10^{13}$                             | 0    | 16,7          |
| $\text{CH}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{CHO} + \text{OH}$                              | $3,5 \times 10^{13}$                             | 0    | 14,7          |
| $\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{CHO} + \text{H}_2\text{O}$                    | $3,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 5,0           |
| $\text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CHO} + \text{CH}_4$                         | $1,0 \times 10^{11}$                             | 0    | 25,5          |
| $\text{CH}_2\text{O} + \text{Ar} \rightarrow \text{CHO} + \text{H} + \text{Ar}$ ( $k_i$ )        | $5,0 \times 10^{16}$                             | 0    | 320           |
| Reakciók $\text{CHO}$ -ból   |  |      |               |
| $\text{CHO} + \text{H} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$                                       | $2,0 \times 10^{14}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CHO} + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$  | $3,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CHO} + \text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$                                       | $3,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CHO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$                              | $5,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CHO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{HO}_2$                                    | $3,0 \times 10^{12}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CHO} + \text{Ar} \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{Ar}$ ( $k_i$ )                  | $2,5 \times 10^{14}$                             | 0    | 70,3          |
| Reakciók $\text{CH}_2$ -ből  |  |      |               |
| $\text{CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$                                      | $4,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CH}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{H}$                             | $5,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CH}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H} + \text{H}$                         | $1,3 \times 10^{13}$                             | 0    | 6,3           |
| $\text{CH}_2 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$                          | $4,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| Reakciók $\text{CH}$ -ból  |  |      |               |
| $\text{CH} + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H}$  | $4,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CH} + \text{O} \rightarrow \text{CHO}^- + \text{e}$                                       | $2,5 \times 10^{11}$                             | 0    | 7,1           |
| $\text{CH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{termék}$   | $2,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| Reakciók $\text{CH}_3\text{OH}$ -ból   |  |      |               |
| $\text{CH}_3\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2$                   | $4,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 25,5          |
| $\text{CH}_3\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$                    | $1,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 19,6          |
| $\text{CH}_3\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2\text{O}$          | $1,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 7,1           |
| $\text{CH}_3\text{OH} + \text{Ar} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH} + \text{Ar}$ ( $k_i$ )     | $2,0 \times 10^{17}$                             | 0    | 286           |
| $\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$ ( $k_c$ )                             | $9,4 \times 10^{15}$                             | 0    | 376           |
| Reakciók $\text{CH}_3\text{O}/\text{CH}_2\text{OH}$ -ból   |  |      |               |
| $\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$                    | $2,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$                   | $3,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 0             |
| $\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{HO}_2$                 | $1,0 \times 10^{13}$                             | 0    | 30,0          |
| $\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H} + \text{M}$ ( $k_i$ ) | $1,0 \times 10^{14}$                             | 0    | 105           |
| $\text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O}$ ( $k_c$ )                                  | $1,6 \times 10^{14}$                             | 0    | 105           |

19. ábra

dulkönyvtárból veszek ki egy részletet, ám a reakciók száma körülbelül 300 lehet [21].

Ezek nem mindegyike jut szerephez a metán oxidációjában, a válogatást a természet végzi el, és a válogatás eredménye az a 44 elemi reakció, amelyet a 20. ábrán mutatok be. Ez a 44 reakció egy struktúrát ad meg, és a 21. ábrán meg is mutatom ezt a struktúrát. Ha elindulunk a metántól, akkor mindenféle gyökön meg stabil komponenseken keresztül eljutunk egyrészt az acetilénig, másrészt a szén-dioxidig. Az előbbi végső pirolízis termék, az utóbbi végső oxidációs termék. Amit ez az ábra mutat, az a matematika nyelvén szólva gráf, mégpedig irányított gráf, mert hiszen a nyilak mutatják az átalakulás irányát, s azt, hogy nincs benne visszafelé vezető út.

Csakhow tudjuk, hogy ez a kép nem való-sághű, és ha a 44 reakciós szerkezetet vesszük figyelembe, akkor más képet kapunk a metánoxidáció históriájáról. A 22. ábrán éppen ezt mutatom meg egy Shankey-diagramon, amely arra az időpontra vonatkozik, amikor a bejövő oxigén 98 százaléka már elhasználódott.

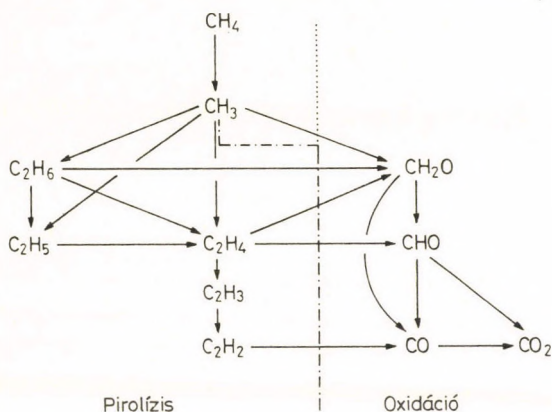
A metán bomlik valahogyan metilgyökre, s ez a gyök visszaalakul, legalábbis részben, metánná. Ez máris nagyon érdekes dolog, mert a visszaalakult metán mennyisége körülbelül annyi, mint a bemenő metáné. Az is jól kivehető, hogy a metilgyök másik fele, mielőtt más lényeges történne vele, átalakul egy stabil

1.  $\text{CH}_4 + \text{M} = \text{CH}_3 + \text{H} + \text{M}$
2.  $\text{CH}_4 + \text{H} = \text{CH}_3 + \text{H}_2$
3.  $\text{CH}_3 + \text{H}_2 = \text{CH}_4 + \text{H}$
4.  $\text{CH}_4 + \text{O} = \text{CH}_3 + \text{OH}$
5.  $\text{CH}_4 + \text{OH} = \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$
6.  $\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O} = \text{CH}_4 + \text{OH}$
7.  $\text{CH}_3 + \text{O}_2 = \text{CH}_2\text{O} + \text{OH}$
8.  $\text{CH}_3 + \text{O} = \text{CH}_2\text{O} + \text{H}$
9.  $\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{CHO}$
10.  $\text{CHO} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{CO}$
11.  $\text{CH}_2\text{O} + \text{M} = \text{CO} + \text{H}_2 + \text{M}$
12.  $\text{CHO} + \text{M} = \text{CO} + \text{H} + \text{M}$
13.  $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$
14.  $\text{CO}_2 + \text{H} = \text{CO} + \text{OH}$
15.  $\text{CO} + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + \text{O}$
16.  $\text{CO} + \text{O} + \text{M} = \text{CO}_2 + \text{M}$
17.  $\text{O} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{OH}$
18.  $\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$
19.  $\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$
20.  $\text{H} + \text{H}_2\text{O} = \text{OH} + \text{H}_2$
21.  $\text{OH} + \text{OH} = \text{O} + \text{H}_2\text{O}$
22.  $\text{O} + \text{H}_2\text{O} = \text{OH} + \text{OH}$
23.  $\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$
24.  $\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$
25.  $\text{O}_2 + \text{H}_2 = \text{OH} + \text{OH}$
26.  $\text{O}_2 + \text{M} = \text{O} + \text{O} + \text{M}$
27.  $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 = \text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_4$
28.  $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 = \text{H} + \text{C}_2\text{H}_5$
29.  $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 = \text{C}_2\text{H}_6$
30.  $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{M} = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{M}$
31.  $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{M} = \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H} + \text{M}$
32.  $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} = \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$
33.  $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} = \text{CH}_3 + \text{CHO}$
34.  $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} = \text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{O}$
35.  $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{M} = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} + \text{M}$
36.  $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H} = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$
37.  $\text{C}_2\text{H}_6 = \text{CH}_3 + \text{CH}_3$
38.  $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H} = \text{H} + \text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_4$
39.  $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{CH}_3 = \text{CH}_4 + \text{H} + \text{C}_2\text{H}_4$
40.  $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}_5$
41.  $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{O} = \text{CH}_3 + \text{H} + \text{CH}_2\text{O}$
42.  $\text{C}_2\text{H}_5 = \text{H} + \text{C}_2\text{H}_4$
43.  $\text{C}_2\text{H}_5 + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{C}_2\text{H}_4 + \text{O}$
44.  $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} = \text{CH}_3 + \text{CO}$

20. ábra



komponenssé, vagyis etán lesz belőle. Ez az etán — eltekintve attól, hogy egy része metilgyökké alakul vissza — etilgyökön keresztül etilenné, majd újabb átalakulás során acetiléné alakul át. A metilgyöknek az a része, amely

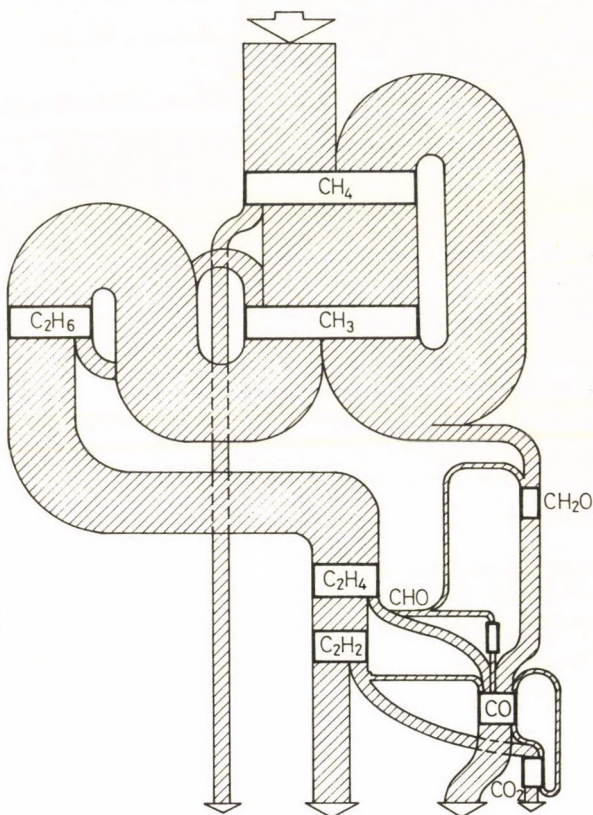


21. ábra

nem dimerizálódik, szűk keresztmetszeten keresztülhaladva oxidálódik. Mi ennek a dolognak a magyarázata? Mi az oka annak, hogy itt recirkuláció van? Ennek oka az, amint mondtam, hogy az átalakulási keresztmetszet szűk, ami a reakciókinetika nyelvén úgy fogalmazható, hogy a metán bomlása metilgyökké egy sereg párhuzamos reakcióban igen gyorsan megyen végbe, ellenben a metilgyök fogyása a stabil termékek irányába lassúbb, ezért tehát a metilgyök részben felhalmozódik, rész-

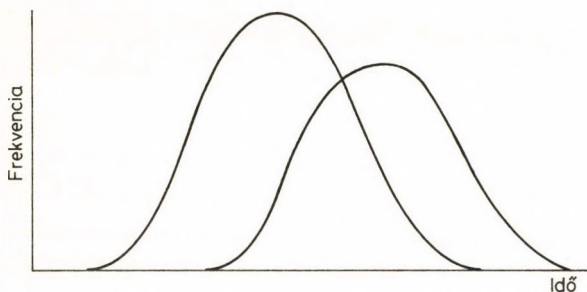
ben visszaalakul metánná. Említettem, hogy ez a karbon története a kezdettől addig, amíg az oxigén 98 százaléka elfogy.

De addig hosszú ám az út. Erről szeretnék mondani valamit a 23. ábra segítségével. Ha ugyanis kiszemelek egy reakciót abból a 44-



22. ábra

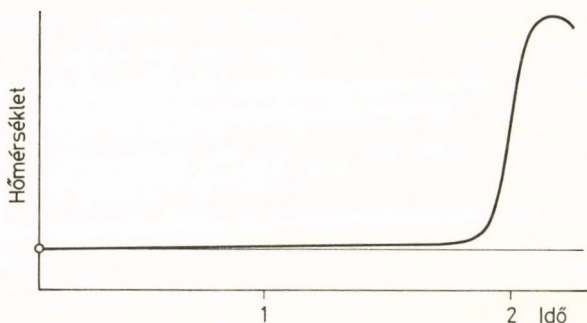
ből, aminek szerepe van a metán oxidációjában, és azt vizsgálom, hogy ennek a reakciónak mekkora az aktuális frekvenciája az idő előrehaladtával — más szóval a metán konverziójának növekedésével —, akkor egy kezdetben növekvő, majd maximumon áthaladó, aztán lecsengő görbét kapunk.



23. ábra

Hasonló görbét kapunk egy más reakcióra, habár az előzőhöz képest az időtengelyen elcsúszva és alighanem kisebb vagy nagyobb maximummal. Ez most már általánossá téve a mondanivalót azt jelenti, hogy ha a metánoxidáció szerkezete nem abszolút, hanem dinamikus, vagyis a szerkezet a modulok mennyiségi viszonyait illetően az idő előrehaladtával folyton folyvást változik. Vagyis a gyökök keletkeznek, aztán reagálnak és elfogynak. Így van ez a természetben. Ebből le lehet vonni talán egyfajta tanulságot az olyan szerkezetekre is,

amelyek nem alakulnak át természeti törvényekben foglalt automatizmus révén, hanem amelyek átalakítása emberi döntést és munkát kíván.



24. ábra

A szerkezet dinamikájának nagy fontossága van más, a metánoxidáció során ugyancsak tapasztalható jelenség megértésében is. Ha metánt és oxigént előírt hőmérsékleten és arányban elegyítünk, akkor nem indul meg azonnal a reakció, nem gyullad meg azonnal az elegy, meglehetősen hosszú időbe telik, amíg valamit egyáltalán észlelünk. Ez az idő mondjuk két másodperc, és ez azért meglehetősen hosszú, mert a tulajdonképpeni oxidáció aztán már vagy két század másodperc alatt lezajlik. Ezt látjuk a 24. ábrán, ahol a reakció előrehaladását az időben a reakcióelegy hőmérséklete méri. Mi a magyarázata ennek a késlekedésnek, az indukciós idő létének? Kezdetben nincsenek



jelen a kiinduló elegyben azok a gyökök, amelyek a metánt fogyasztják. Tehát nekik keletkezniök kell és valamelyest feldúsulni, s aztán amikor már eléggé feldúsultak, akkor indul meg a gyors reakció. Érdekes és érdemes a természet megoldásait figyelni napjainkban, amikor arról van szó, hogy most egy stabilizációs periódus következik, aztán a kibontakozás, és csak utána a Kánaán. Kérdezik is, hogy miképpen lehetne a stabilizáció éveit lerövidíteni?

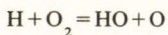
A metánoxidáció indukciós periódusát mi is igyekeztünk rövidíteni különféle műfogásokkal. Így például úgy, hogy a metán egy részét kicseréltük etánra — gondolván, hogy a reakció úgyis etánon megy keresztül —, majd acetilénre, gondolván, hogy annak igencsak nagy az égéshője, és ez majd csak felmelegíti a reakcióelegyet, és akkor a termikus hatás miatt fog a reakció meggyorsulni.

Ezek a dolgok beváltak, és a 25. ábra éppen azt mutatja, hogy ilyen fogásokkal lehetett az indukciós időt csökkenteni, mondjuk tíz százalékkal. Ez éppen olyan, mintha azt mondjuk, hogy át kell alakítani a népgazdaság szerkezetét, hogy az hatékonyabbá váljék, és végére elkezdünk Abonyban extrudált kenyeret gyártani. Csakhogy ez nem az igazi megoldás.

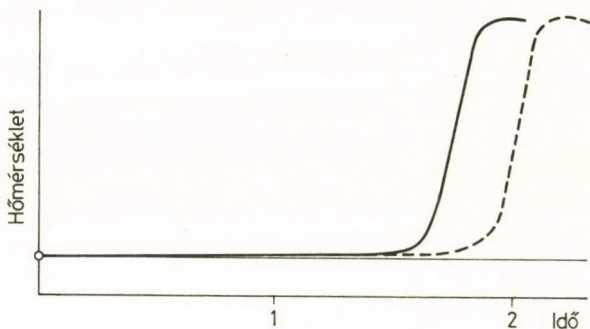
A 26. ábrára térek át azt megmutatni, hogy az indukciós idő jelentős csökkentése is sikerült. Úgy avatkoztunk be a metánoxidáció természet által determinált szerkezetébe, hogy



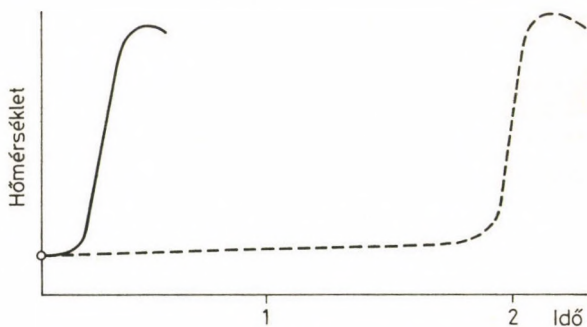
olyan anyagot adagoltunk a reakcióelegybe, amely igen gyorsan termelt gyököket.



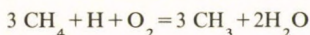
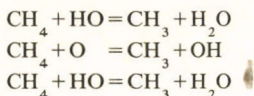
Ez a kulcsreakció, mert a láncreakcióban ez elágazást hoz létre, de úgy, hogy mindkét gyök most már metánnal reagál:



25. ábra



26. ábra



Ez az utolsó reakcióegyenlet az előző négy lineáris kombinációja, és azt jelenti, hogy egyetlen H-atom három gyököt termel, ami igen markáns láncelágazás. Ha tehát mi a metán-oxigén elegybe hidrogént viszünk be a kezdet kezdetén, akkor az indukciós periódus lecsökken. Vagyis van egy modul ebben a szerkezetben, amely — ha külső beavatkozással a súlyát megnöveljük — akkor dinamikai szempontból felgyorsítja, szinte húzza magával az egész átalakulást.

Emberi beavatkozásra van szükség akkor is, ha népgazdaságról van szó és itt is húzó szektorra van szükség. Még senki sem mondta meg, hogy melyik lenne ez a húzó szektor, de mindenesetre ilyen irányban kellene a stabilizáció megrövidítését és a kibontakozás útját keresni. A szerkezet alapos ismeretére és gondos analizisére van szükség. Lássuk csak, miért is.

Most visszatérünk egy egyszerű esetre, amelyben ismét csupán párhuzamos modulok szerepelnek. Az utóbbi években vizsgáltuk a metanolszintézis reaktorának működését [22, 23].

A szintézis szén-monoxid és hidrogén elegyből indul ki és heterogén katalitikus reakci-

óban valósítható meg, mégpedig csőreaktorban. A 27. ábrán látható az a három párhuzamos modul, amelyek közül az első a reakcióelegy konverzióját, a második a reakcióelegy hőmérsékletét, a harmadik pedig a nyomását adja meg, mindig a reaktor hosszkoordinátája

$$\frac{dy_i}{dZ} = f_{y_i} [T, p_i, \pi_{y_i}]$$

$$\frac{dT}{dZ} = f_T [T, y_i, \pi_T]$$

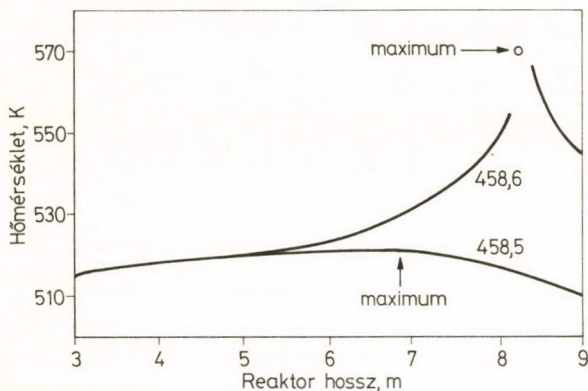
$$\frac{dP}{dZ} = f_P [T, P, \pi_p]$$

27. ábra

mentén. Ha ezeket a modulokat együttesen kezeljük, akkor képet kapunk arról, hogy mi is történik ebben a reaktorban. A reaktor matematikai modelljének felépítéséhez nincs szükség nagyon sok modulra. Valóban csupán három modulra van szükség? A kérdés költői.

A 28. ábrán bemutatom, hogy miképpen változik állandósult üzemben a reagáló gáz hőmérséklete a reaktoron áthaladva. Két görbét is látni a hőmérséklet—hossz koordináta-rendszerben. Az alsó görbén a hőmérséklet fokozatosan emelkedik, eléri maximumát, ezt követően csökken és a külső hőmérséklethez konvergál. Ha ezt a külső hőmérsékletet mindössze 0,1 kelvinnel megemeljük, egy jellegé-

ben más, állandósult állapot jön létre, és ezt írja le a felső görbe. Ez csaknem azonosan indul az előzővel, de aztán a hőmérséklet hirtelen igen magasra emelkedik, a maximum elérése után gyorsan csökken és akárcsak az előbb,



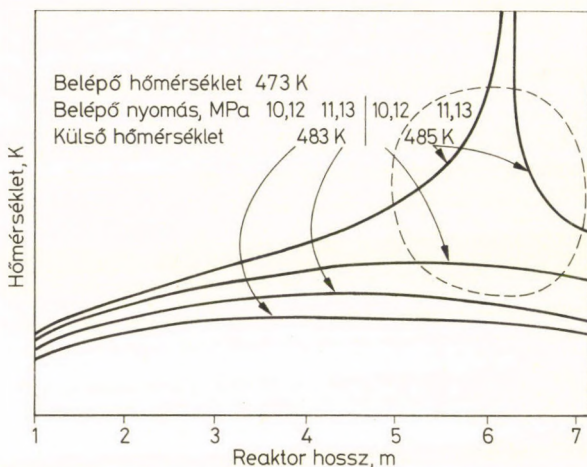
28. ábra

a külső hőmérsékletéhez konvergál. Ezt a jelenséget hívják a reaktorszakmában elszaladásnak. A 29. ábrán ugyanezt a képet látjuk. A különbség ezúttal nem a külső hőmérsékletben van, hanem az üzemnyomásban.

A paraméterek megválasztása emberi döntést igényel, és éppen az a tanulság, hogy az elszaladás jelenségét így is, úgy is kiválthatjuk. Nem ez vagy az a beavatkozás az oka az elszaladásnak, hanem az elszaladás okát idézhetjük elő ilyen, de olyan beavatkozással is.



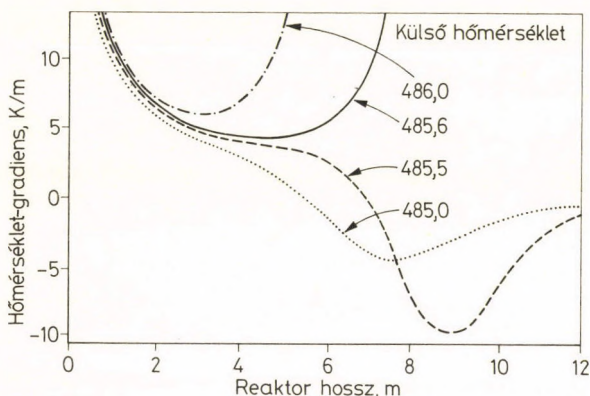
Van itt még egy fontos tanulság. Az tudniillik, hogy van olyan paraméterkombináció, amikor a reaktor nagyon érzékeny egy-egy paraméter értékére, és valamelyik paraméter értékének igen kicsiny megváltoztatása is kibillenti a normál üzemmódból a reaktort, az



29. ábra

fogja magát és elszalad. Ezt az érzékenységet mutatom meg a 30. ábrán, ahol a paraméteres görbesereg jól láthatóan két tartományra válik szét, a normál üzemenet és az elszaladás tartományára. Nem elég ezt egyszerűen tudomásul venni. Mert nem csupán arról van szó, hogy a reaktor az elszaladás után nagyobb hőmérsékleten jár, mint normál esetben, hanem arról, hogy ezen a nagyobb hőmérsékle-

ten új jelenségek lépnek föl a 29. ábrán szaggatott vonallal bejelölt tartományban, és ezeket az a három modul, amelyeket eddig vettünk figyelembe, már nem veszi számba. Nagyobb



30. ábra

hőmérsékleten tönkremehet a katalizátor, repedés keletkezhet a katalizátort tartalmazó csövek egyikében-másikában, és ekkor a hidrogén kiszökik a külső térbe, hidrogénrobbanás keletkezhet és bekövetkezhet a Challenger—Csernobil katasztrófa. Vagyis az a görbe, az a viselkedés, amelyet az elszaladás esetére prognosztizál a három párhuzamos modul, már nagyon távol esik a valóságtól és nem mond semmit sem a reaktor ténylegesen várható viselkedéséről. A kezdetben feltett költői kérdésre a költő válaszol:

Repül a nehéz kő: ki tudja hol áll meg?

Ki tudja hol áll meg s kit hogyan talál meg?

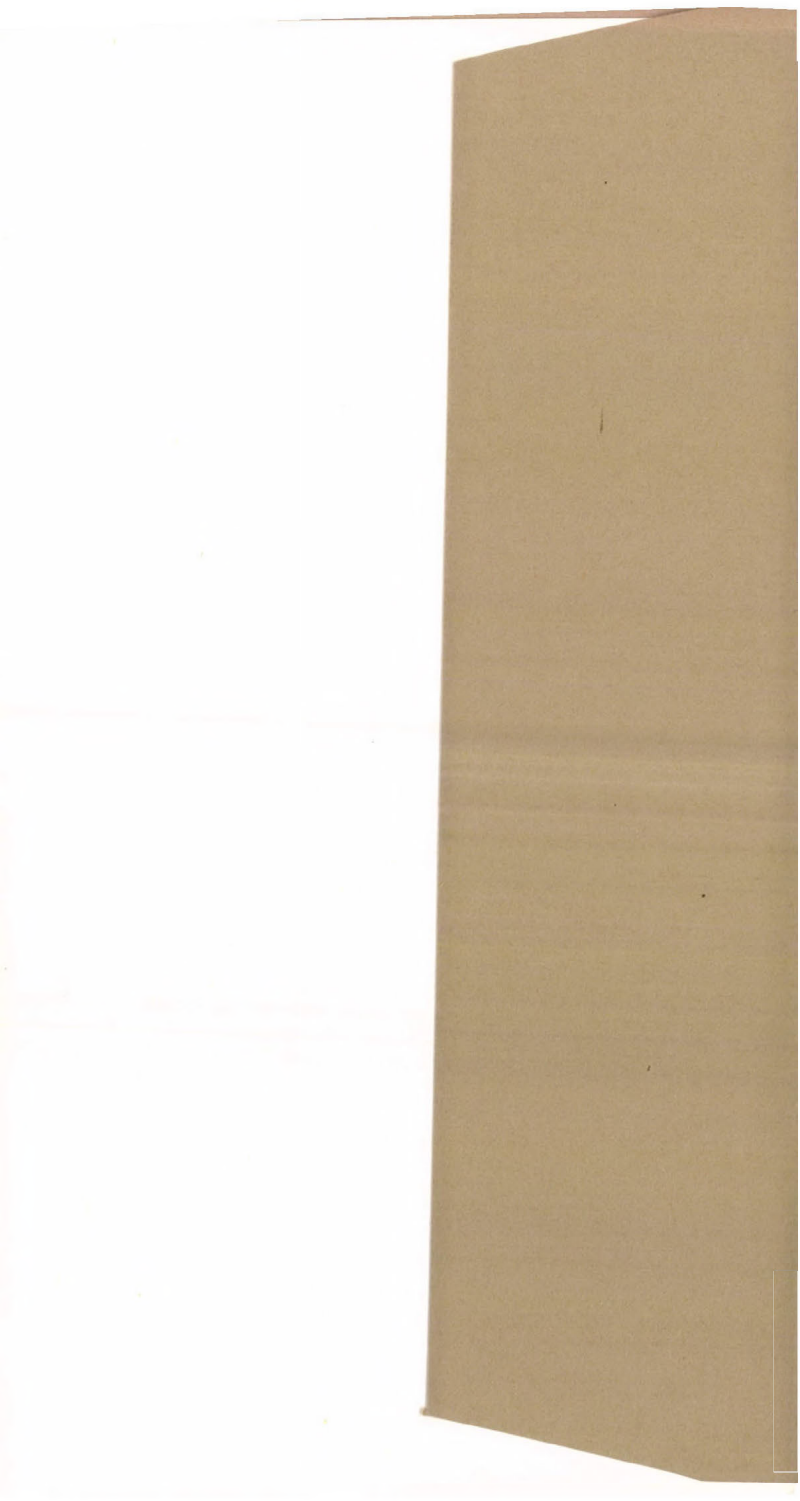
## IRODALOM

1. JANKÓ T., Doktori értekezés. Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1986.
2. BENEDEK, P., JANKÓ, T., Investigation and improvement of the Horváth-Lin equation of state. *J. Chromatography* **499**, 463-467 (1990).
3. BENEDEK, P., Investigation of and new results with the Horvath-Lin equation of state. Seminar, Yale University, Dept of Chemical Engineering, 1987.
4. HORVATH, Cs., LIN, H-J., *The Canadian Journal of Chemical Engineering* **55**, 450 (1977).
5. SOAVE, G., *Chem. Eng. Sci.* **27**, 1197 (1972).
6. VARGA E., Szakdolgozat. Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1991.
7. JÓZSA L., BENEDEK P., Desztillációs szekvencia tervezése. *Magyar Kémikusok Lapja* (előkészületben).
8. ERDŐS I., Kandidátusi értekezés, Budapest, 1982.
9. BOROSSY A. G., Szakdolgozat. Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1989.
10. BENEDEK P., SZATMÁRI G., A gyógyszeripar és szerves vegyipari hazai nyersanyagbázis bővítési lehetőségeinek vizsgálata. Országos Műszaki Fejlesztési Bizottság, 6-504-ET, Budapest, 1967.
11. BENEDEK, P., PREISICH, M., Separation of C<sub>4</sub> Hydrocarbons. in: HANCOCK, E. (Ed.) *The C<sub>4</sub> Hydrocarbons and their Industrial Derivatives*. Ernest Benn, London. 1980.
12. NÉMETH A., BENEDEK P. és VÁCZI P., *Magy. Kém. Lapja* **29**, 100 (1974).
13. BENEDEK, P., LÁSZLÓ, A., NÉMETH, A., VÁCZI, P., Deuxième Symposium Européen sur la Combustion, Vol. I. 154. The Combustion Institute, Orleans (1975).
14. BENEDEK, P., LÁSZLÓ, A., NÉMETH, A., VÁCZI, P., *Hung. J. Ind. Chem.* **4**, 77 (1976).

15. BENEDEK, P., LÁSZLÓ, A., NÉMETH, A., VÁCZI, P., Hung J. Ind. Chem. **5**, 133 (1977).
16. BENEDEK, P., LÁSZLÓ, A., NÉMETH, A., VÁCZI, P., Congres International, Contribution des calculateurs electroniques au developement du genie chimique, Section C, 120 Paris (1978).
17. BENEDEK, P., LÁSZLÓ, A., NÉMETH, A., VÁCZI, P. VI. Int. Symp. on Combustion Processes, Karpacz (1979).
18. BENEDEK, P., LÁSZLÓ, A., NÉMETH, A., VÁCZI, P., Hung. J. Ind. Chem. **9**, 125 (1981).
19. BENEDEK, P., LÁSZLÓ, A., NÉMETH, A., VÁCZI, P., Oxidation Communications **6**, 247 (1984).
20. BENEDEK, P., NÉMETH, A., VÁCZI, P., The Twentieth Int. Symp. on Combustion, **8/31**, The Combustion Institute, Ann Arbor (1984).
21. WARNATZ, J., Rate Coefficients in the C-H-O System. in: GARDINER, W. C. (Ed.) Combustion Chemistry, Springer Verlag, 1984.
22. BENEDEK, P., HOLDERITH J., VALKÓ P., National Meeting of AIChE, Denver, 1983.
23. BENEDEK P., RAYMOND P., Structural and Parametric Sensitivity of Uckron-I Test Problem. In: BERTY, J. M. (Ed.) International Workshop on Kinetic Model Development. The University of Akron 1987.



A kiadásért felelős  
az Akadémiai Kiadó és Nyomda Vállalat igazgatója  
A nyomdai munkálatokat  
az Akadémiai Kiadó és Nyomda Vállalat végezte  
Felelős vezető: Zöld Ferenc  
Budapest, 1991  
Nyomdai táskaszám: 19720  
Felelős szerkesztő: Nagy Tibor  
Műszaki szerkesztő: Kiss Zsuzsa  
Kiadványszám: 2808  
Megjelent: 2,17 (A/5) ív terjedelemben  
HU ISSN 0236-6258



Ára: 60,- Ft